



Львів, 15-16 жовтня 2026

**26-та Всеукраїнська
школа-семінар
молодих вчених**

**зі статистичної фізики
та теорії конденсованої речовини**

Збірка тез



**Інститут фізики конденсованих систем
імені І.Р. Юхновського НАН України**

**XXVI Всеукраїнська школа-семінар
молодих вчених
зі статистичної фізики
та теорії конденсованої речовини — 2026**

**Львів, 15–16 жовтня 2026 р.
Інститут фізики конденсованих систем
імені І.Р. Юхновського НАН України**

ПРОГРАМА ТА ТЕЗИ

Львів — 2026

Школа-семінар дає можливість молодим науковцям отримати досвід представлення результатів власних досліджень та познайомитись з іншими актуальними проблемами статистичної фізики у дискусіях за участі провідних спеціалістів.

В програмі:

- Запрошені лекції провідних науковців у галузі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини
- Короткі повідомлення молодих дослідників

До участі в роботі Школи-семінару запрошуються молоді науковці віком до 35 років, студенти, аспіранти.

Робоча мова семінару — українська.

Адреса для контактів

Рада молодих вчених ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України
вул. Свенціцького, 1, 79011 Львів, Україна

Тел: +38 032 2761978

Факс: +38 032 2761158

Електронна пошта: rmv@icmp.lviv.ua, icmp.cys@gmail.com

Веб-сторінка конкурсу: <https://icmp.lviv.ua/konkurs/>

Рада молодих вчених: <https://icmp.lviv.ua/cys/>

**XXVI Всеукраїнська школа-семінар
молодих вчених
зі статистичної фізики
та теорії конденсованої речовини — 2026**

Програма

Львів, 15–16 жовтня 2026 р.

Четвер, 15 жовтня 2026 р.

09:00 – 09:10 ІГОР МИРОНОВИЧ МРИГЛОД
Вітальне слово від організаторів
ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів

Засідання I

Головує ІГОР МИРОНОВИЧ МРИГЛОД

09:10 – 10:10 Запрошена лекція
АНДРІЙ АДАМОВИЧ РОВЕНЧАК
Неідеальні ферміони vs дробові статистики
ЛНУ ім. І. Франка, Львів

10:10 – 10:25 ОЛЕКСАНДР ЗАКРЕВСЬКИЙ
**Геометрія та швидкість редукованої динаміки у
двоспіновій моделі Гайзенберга**
ЛНУ ім. І. Франка, Львів

10:25 – 10:40 БОГДАН ГНАТЕНКО
**Квантові стани, які відповідають графам з внутрішнім
порядком, та обчислення їх заплутаності**
ЛНУ ім. І. Франка, Львів

10:40 – 10:55 КИРИЛО КОВАЛЬЧУК
**Теоретичне дослідження ефективного утворення та
виведення конденсату Бозе-Ейнштейна в оптичних
пастках**
КНУ ім. Т. Шевченка, Київ

10:55 – 11:10 ПЕТРО САПРІЯНЧУК
**Стохастична динаміка моделі молекул води у
вуглецевій нанотрубці**
ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів

11:10 – 11:30 Перерва

Четвер, 15 жовтня 2026 р.

Засідання II

Головує МАКСИМ ЛЕОНІДОВИЧ ДУДКА

- 11:30 – 12:30 Запрошена лекція
ЯРОСЛАВ МИКОЛАЙОВИЧ ІЛЬНИЦЬКИЙ
Метод динаміки дисипативних частинок: основи та застосування
ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
- 12:30 – 12:45 ПЕТРО САРКАНИЧ
Ethereum Transaction Networks: Structure, Communities, and Growth Mechanisms
ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
 $\mathbb{L}^4$ Collaboration & Doctoral College, Europe
- 12:45 – 13:00 ВАСИЛЬ ПОЛКАНОВ
Динаміка утворення тримерів у низьковимірній фермі-системі із тричастинковою взаємодією
ЛНУ ім. І. Франка, Львів
- 13:00 – 13:15 МУСФЕР АДЖИМАМБЕТОВ
Рівняння стану квантової хроمودинаміки на основі нейронної мережі
ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ
- 13:15 – 13:30 БОГДАН СЕМЕНЮК
Передбачення кристалічних структур за допомогою еволюційних алгоритмів та машинного навчання
КАУ, Київ
- 13:30 – 14:30 Обідня перерва

Четвер, 15 жовтня 2026 р.

Засідання III

Головує Андрій Михайлович Швайка

- 14:30 – 15:30 Запрошена лекція
МАКСИМ БОГДАНОВИЧ ЦІЖ
**Найбільша система у Всесвіті зі статистикою
Фермі-Дірака: реліктовий нейтринний фон**
ЛНУ ім. І. Франка, Львів
- 15:30 – 15:45 ОЛЕКСА ГРИНІВ
**Фазовий перехід і тримеризація в зигзагоподібному
ланцюжку Гайзенберга з симетрією SU(3)**
ІНЦ ХФТІ, ІТФ ім. О.І. Ахієзера НАН України, Харків
- 15:45 – 16:00 ТАРАС ГУТАК
**Ефективні моделі для опису плато намагнічення
моделі Шастри-Сазерленда**
ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
- 16:00 – 16:15 Ілля ЛУКІН
**Модель Гейзенберга на ґратці гіперкагоме із
тривимірними тензорними мережами**
*ІНЦ ХФТІ, ІТФ ім. О.І. Ахієзера НАН України, Харків
Haiqi, Inc., San Francisco, USA*
- 16:15 – 16:30 МАКСИМ ПАРИМУДА
**Термодинаміка квантового антиферромагнетика
Гайзенберга на ґратці квадратне кагоме**
ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
- 16:30 – 16:50 Перерва

Четвер, 15 жовтня 2026 р.

Засідання IV

Головує ТАРАС МИХАЙЛОВИЧ ВЕРХОЛЯК

- 16:50 – 17:05 Юлія ГОРБАТЕНКО
Low-energy excitations and thermal transport in thermally reduced graphene oxide
ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України, Харків
- 17:05 – 17:20 ТАРАС ДЕМЧУК
Поверхнева вільна енергія перовскіту CsPbBr_3 з комп'ютерного експерименту
ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
- 17:20 – 17:35 АНТОН ЛУПАНОВ
Приготування та властивості фрактальних квантових станів, що відповідають піраміді Серпінського
ЛНУ ім. І. Франка, Львів

П'ятниця, 16 жовтня 2026 р.

Засідання V

Головує Андрій Романович Кузьмак

- 09:00 – 10:00 Запрошена лекція
Микола Максименко
Квантові комп'ютери для практичних досліджень у фізиці конденсованих систем. Як штучний інтелект дозволяє пришвидшити процес з місяців до днів.
Haiqi, Inc., San Francisco, USA
- 10:00 – 10:15 Маркіян Качмар
Квантові обчислення швидкості еволюції спінових систем у магнітному полі та структурні властивості зважених графів
ЛНУ ім. І. Франка, Львів
- 10:15 – 10:30 Наталія Сусуловська
Дослідження запутаності чистих та змішаних багатокубітних квантових станів з використанням квантових обчислень
ЛНУ ім. І. Франка, Львів
- 10:30 – 10:45 Степан Пирин
Запутаність фрактальних квантових станів, що відповідають множині Кантора
ЛНУ ім. І. Франка, Львів
- 10:45 – 11:00 Михайло Тонне
Квантові обчислення запутаності та швидкості еволюції двоспінової системи з моделлю XXZ
ЛНУ ім. І. Франка, Львів
- 11:00 – 11:20 Перерва

П'ятниця, 16 жовтня 2026 р.

Засідання VI

Головує Ярослав Миколайович Ільницький

- 11:20 – 12:20 Запрошена лекція
ОКСАНА ВАДИМІВНА ПАЦАГАН
Мезоскопічна теорія концентрованих іонних систем
ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
- 12:20 – 12:35 Ілля Піскунов
Квантово-хімічна інтерпретація водневих зв'язків у рідкому етиламоній форміаті за результатами МД моделювання
ХНУ ім. В.Н. Каразіна, Харків
- 12:35 – 12:50 Ярополк Пацаган
Адсорбція плямистих частинок на поверхню з притягальними доменами
ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
- 12:50 – 13:05 Євген Осокін
Квантово-хімічне моделювання комплексів Ag^+ із парами нуклеотидних основ
ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ
- 13:05 – 13:20 Дмитро Яремчук
Потік реагентів через каталітичний гель: комп'ютерне моделювання методом дисипативної динаміки
ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
- 13:20 – 14:30 Обідня перерва

П'ятниця, 16 жовтня 2026 р.

Вечірнє засідання 14:30 – 17:00

Засідання VII

Головує ТАРАС МИКОЛАЙОВИЧ ПАЦАГАН

- 14:30 – 15:30 Запрошена лекція
ХРИСТИНА АРКАДІЙВНА ГАЙДУКІВСЬКА
Тонкощі, пастки та приємні несподіванки при моделюванні конформаційних властивостей полімерів
ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
- 15:30 – 15:45 Остап Калюжний
Дослідження адсорбції низькомолекулярних домішок мікрогелями мезоскопічними методами комп'ютерного моделювання
ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
- 15:45 – 16:00 Роман Сокирко
Моделювання агрегації білків на комп'ютерах
ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
- 16:00 – 16:15 Юліан Гончар
Моделювання напівгнучких полімерів: блукання Леві
ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
 $\mathbb{L}^4$ Collaboration & Doctoral College for the Statistical Physics of Complex Systems, Leipzig-Lorraine-Lviv-Coventry, Europe
- 16:15 – 16:45 Перерва
- 16:45 – 17:15 Підбиття підсумків

**XXVI Всеукраїнська школа-семінар
молодих вчених
зі статистичної фізики
та теорії конденсованої речовини — 2026**

Доповіді школи-семінару

Львів, 15–16 жовтня 2026 р.

Геометрія та швидкість редукованої динаміки у двоспіновій моделі Гайзенберга

О.О. Закревський

*Львівський національний університет ім. І. Франка, кафедра
теоретичної фізики ім. професора І. Вакарчука, вул. Драгоманова, 12,
79005 Львів, Україна, E-mail: moryl.posa@gmail.com*

Досліджено редуковану динаміку одного спіну в системі двох спінів $1/2$, зв'язаних ізотропною взаємодією Гайзенберга у локальних магнітних полях. Для початкового добуткового стану $|\psi(0)\rangle = |+\rangle \otimes |-\rangle$ отримано точні вирази для редукованої матриці густини та вектора Блоха $\mathbf{a}(t)$. Доведено, що незалежно від форми проміжної траєкторії всередині кулі Блоха, усі точки точного відновлення чистоти належать екватору сфери Блоха, тобто задовольняють умовам $|\mathbf{a}(t_*)| = 1$ та $a_z(t_*) = 0$.

Знайдено аналітичний вираз для швидкості Гільберта–Шмідта $\nu_{\text{HS}}(t)$ редукованого стану та проаналізовано її залежність від величини взаємодії і різниці локальних полів. Показано, що керування локальними полями дає змогу змінювати профіль швидкості та забезпечувати вигравш у часі досягнення заданого чистого стану порівняно з поверхневою прецесією незв'язаного спіну.

Квантові стани, які відповідають графам з внутрішнім порядком, та обчислення їх запутаності

Б. Гнатенко

Львівський національний університет ім. І. Франка, кафедра теоретичної фізики ім. професора І. Вакарчука, вул. Драгоманова, 12, 79005 Львів, Україна, E-mail: bohdan.hnatenko@lnu.edu.ua

У роботі розглядаються квантові стани, які відповідають графам з внутрішнім порядком. Відповідні квантові стани отримуються шляхом послідовного виконання двокубітних квантових операцій, кожна з яких відповідає ребру графової структури. Кількість кубітів відповідає кількості вузлів у графі. На відміну від звичайних графових станів для опису графових структур з внутрішнім порядком важлива є послідовність виконання операцій. Тому для побудови таких станів використовуються оператори, які не комутують. Зміна їхнього порядку приводить до зміни кінцевого квантового стану, та відповідно структури графа.

Квантова запутаність є важливою властивістю квантових станів. і визначає характер кореляцій між їхніми складовими. Вона лежить в основі багатьох квантових технологій, зокрема квантових обчислень, квантових комунікацій [1, 2]. Досліджено запутаність квантових графових станів з внутрішніми порядком з використанням квантового програмування.

- [1] R. Horodecki, P. Horodecki *et al.*, [Rev. Mod. Phys.](#), **81**, 865 (2009).
- [2] A. Vesperini, R. Franzosi, [Adv. Quantum Technol.](#), **7**, 2300264 (2024).

Теоретичне дослідження ефективного утворення та виведення конденсату Бозе-Ейнштейна в оптичних пастках

К.Г. Ковальчук, О.І. Якименко

*Київський національний університет ім. Т. Шевченка, фізичний факультет, проспект Академіка Глушкова, 4, 03680 Київ, Україна,
E-mail: kovalchukkyrylo.kk@gmail.com*

У роботі ми теоретично досліджуємо процеси утворення, поповнення та багаторазового виведення конденсатів Бозе-Ейнштейна (БЕК) в оптичних пастках, що сполучені з тепловим резервуаром атомів. Динаміка конденсату описується за допомогою підходу, що ґрунтується на кінетиці заселеності та враховує Бозе-стимульоване зростання, випаровування, тричастинкову рекомбінацію й поповнення теплового резервуара.

Спершу аналізується динаміка утворення для витягнутої конфігурації пастки, що відповідає експериментальним умовам. Завдяки застосуванню кінетичної моделі до доступного діапазону параметрів пастки та атомів визначено область, у якій відбувається помітне утворення конденсату. Це дозволяє встановити умови, за яких отримання БЕК є можливим у межах технічних можливостей розглянутої експериментальної установки команди з Технічного університету в Дармштадті.

Далі дослідження поширюється на процеси багаторазового утворення та виведення конденсату. Розглядаються різні протоколи виведення, щоб з'ясувати, як залишковий обсяг конденсату впливає на його подальше зростання. Збереження залишкового конденсату слугує базою для нового Бозе-стимульованого зростання та суттєво скорочує час відновлення між циклами виведення, водночас посилюючи залежні від густини тричастинкові втрати. У результаті знайдено оптимальний баланс між цими конкуруючими процесами. Серед розглянутих теоретичних імпульсних протоколів метод часткового видалення конденсату забезпечує найвищу ефективність поповнення, що сягає приблизно 30%.

Отримані результати визначають експериментально досяжні умови утворення БЕК та пропонують теоретичні робочі режими для ефективного багаторазового або безперервного отримання конденсату.

Стохастична динаміка моделі молекул води у вуглецевій нанотрубці

П. Сапріянчук

*Інститут фізики конденсованих систем ім. І.Р. Юхновського
НАН України, вул. Свєнціцького, 1, 79011 Львів, Україна,
E-mail: psapr@ictp.lviv.ua*

Рой Глаубер у 1963 році показав, що динаміку стану одного або багатьох Ізінгових спінів у ланцюжку можна визначити за допомогою системи керівних рівнянь, яка є системою диференціальних рівнянь першого порядку. У систему спінів можна додати змінне в часі зовнішнє магнітне поле, і дослідити залежність магнітної сприйнятливості такої системи від частоти магнітного поля [1].

Ми будуємо систему керівних рівнянь для моделі молекул води у вуглецевій нанотрубці [2,3], досліджуємо як ця система еволюціонує в часі, та знаходимо залежність електричної сприйнятливості такої системи від частоти зовнішнього електричного поля.

Ці дослідження виконані у співпраці із М. Дручком, В. Красновим, Т. Крохмальським та О. Держком.

- [1] R. Glauber, *J. Math. Phys.* **4**(2), 294-307 (1963).
- [2] X. Ma, S. Cambre *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 027402 (2017).
- [3] M. Druchok, V. Krasnov *et al.*, *J. Chem. Phys.* **158**, 104304 (2023).

Ethereum Transaction Networks: Structure, Communities, and Growth Mechanisms

P. Sarkanych^{a,b}, T. Holovatch^{a,b}, Y. Holovatch^{a,b,c,d}, S. Kitzler^{d,e},
B. Haslhofer^d

^a *Yukhnovskii Institute for Condensed Matter Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv, Ukraine*

^b *IL⁴ Collaboration & Doctoral College for the Statistical Physics of Complex Systems, Leipzig-Lorraine-Lviv-Coventry, Europe*

^c *Centre for Fluid and Complex Systems, Coventry University, Coventry, United Kingdom*

^d *Complexity Science Hub, Vienna, Austria*

^e *AIT Austrian Institute of Technology, Vienna, Austria*

We investigate Ethereum transaction networks using monthly snapshots of transactions recorded from 2018 to 2024. Each network consists of Ethereum addresses connected by undirected weighted edges, with edge weights representing the sum of all transferred amounts between a pair of addresses within a given month. We examine their topological properties and community structure.

Throughout the studied period, the degree distributions show approximately power-law behavior, $P(k) \sim k^{-\gamma}$, with a decay exponent $\gamma < 2$. This observation motivates a simple preferential-attachment-like growth model that allows for the formation of additional links between existing nodes. By varying the model parameters, we obtain different degree-distribution decay exponents below 2, qualitatively reproducing the observed behavior and suggesting a possible role of accelerated growth mechanisms in the formation of these networks.

The detected community structure is characterized by tens of thousands of communities and modularity $Q > 2/3$. Nevertheless, the 20 largest communities contain approximately 85–90% of all nodes, revealing a strongly uneven community-size distribution. These findings highlight persistent structural features of Ethereum transaction networks and suggest possible mechanisms underlying their formation.

Динаміка утворення тримерів у низьковимірній фермі-системі із тричастинковою взаємодією

В. Полканов

Львівський національний університет ім. І. Франка, кафедра теоретичної фізики ім. професора І. Вакарчука, вул. Драгоманова, 12, 79005 Львів, Україна, E-mail: cogersum92@gmail.com

Досліджено динаміку квенчу (раптової зміни параметрів гамільтоніана) в системі трьох SU(3)-ферміонів однакової маси з тричастинковою взаємодією в ефективній просторовій розмірності $d < 2$. Для опису взаємодії використано модель вузького тричастинкового резонансу Фешбаха, яка дає змогу враховувати скінченний ефективний радіус взаємодії та розділити відкритий і закритий канали [1].

На основі точного розв'язку нестационарного рівняння Шредінгера досліджено два протилежні сценарії квенчу. У першому випадку система спочатку перебуває у стані нерухомого закритоканального тримера, після чого міжканальна взаємодія раптово вмикається до скінченного значення. Показано, що ймовірність перебування у закритому каналі спочатку зменшується, а надалі, осцилюючи, виходить на стаціонарний рівень. Отримано густину ймовірності кінетичної енергії тримера для декількох моментів часу після квенчу.

У другому сценарії початковим станом є відкритоканальний тример у межі широкого резонансу, після чого радіус взаємодії раптово збільшується. Виявлено немонотонну залежність ймовірності утворення закритоканального тримера від ефективного радіуса взаємодії на пізніх етапах еволюції системи: існує оптимальне значення параметра, за якого ця ймовірність максимальна.

Таким чином, обидва сценарії приводять до співіснування відкритого та закритоканального тримерних станів, хоча їхня динаміка відрізняється.

[1] V. Polkanov and V. Pastukhov, [Phys. Rev. A](#), **109**, 043322 (2024).

Рівняння стану квантової хромодинаміки на основі нейронної мережі

М. Аджимамбетов

*Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України,
вул. Метрологічна, 14-б, 03143 Київ, Україна,
E-mail: adzhymambetov@gmail.com*

У доповіді я продемонструю метод побудови термодинамічного рівняння стану (РС) за допомогою нейронної мережі. Як основний приклад, я розгляну квантову хромодинаміку (КХД) — фундаментальну модель сильної взаємодії. Побудоване рівняння стану є чотиривимірним (температура та три хімічні потенціали) і описує результати ґраткових розрахунків КХД за малих густин баріонного заряду та ефективну модель адрон-резонансного газу за низьких температур. Архітектура нейронної мережі одночасно забезпечує термодинамічну самоузгодженість РС, його стабільність, та зарядову симетрію КХД. Усі термодинамічні спостережувані можуть бути розраховані за допомогою автоматичного диференціювання у нейронній мережі. Модель екстраполює в область у яких теоретичні моделі не застосовні, проте яка є цікавою з точки зору колайдерних експериментів. Наостанок я надам оцінки невизначеностей у такому підході та приклад застосування цього РС у гідродинамічній моделі для описання колайдерних експериментів.

Передбачення кристалічних структур за допомогою еволюційних алгоритмів та машинного навчання

Б. Семенюк, О.Д. Фея

*Київський академічний університет, бул. Академіка Вернадського, 36,
03142 Київ, Україна*

Передбачення кристалічної структури за хімічним складом (Crystal Structure Prediction) зводиться до пошуку глобального мінімуму енергії (при тиску P — ентальпії $H = E + PV$) на багатовимірній поверхні потенціальної енергії, кількість локальних мінімумів якої зростає експоненційно з числом атомів. Ми розробили програмний комплекс AGE, що розв'язує цю задачу еволюційним алгоритмом, у якому дорогі DFT-розрахунки замінено машинно-навченими міжатомними потенціалами MACE.

Комплекс написано мовою Python на основі бібліотек ASE, PyXtal та rymatgen. Популяція структур формується генерацією за просторовими групами симетрії (PyXtal), шаруватим генератором або з відомих затравок. Кожна структура релаксується до локального мінімуму на потенціалі MACE ланцюжком оптимізаторів ASE (FIRE, BFGS, LBFGS), після чого нефізичні структури та дублікати відкидаються. Нові покоління утворюються мутаціями (rattle, strain, swap, basin hopping) та успадкуванням найкращих кандидатів, відібраних за енергією або за структурною подібністю до еталонної фази. У режимі змінного складу стехіометрія семплюється для кожної структури окремо, а стабільність оцінюється за опуклою оболонкою (convex hull, rymatgen), для якої еталонні фази бази Materials Project перерелаксовуються тим самим потенціалом. Найкращі кандидати перевіряються методом DFT (Quantum ESPRESSO).

Алгоритм протестовано і продовжує тестуватися на низці систем, пов'язаних із надпровідністю та топологічними станами: купратах, ди-халькогенідах перехідних металів, інтерметалідах вісмуту та нітридах заліза під тиском. Для більшості з них відтворено експериментально відомі основні стани з високою точністю параметрів ґратки, а також виявлено нові низькоенергетичні кандидати. Обмеженням методу залишається точність потенціалу, який для складніших ефектів, зокрема хвиль густини заряду, необхідно донавчати на відповідних DFT-даних.

Фазовий перехід і тримеризація в зигзагоподібному ланцюжку Гайзенберга з симетрією SU(3)

О.Р. Гринів^a, І.В. Лукін^{a,b}, А.Г. Сотніков^{a,c}

^a Інститут теоретичної фізики ім. О.І. Ахієзера ННЦ ХФТИ,
вул. Академічна, 1, 61108 Харків, Україна

^b Haiqi, Inc., 95 Third Street, San Francisco, CA 94103, USA

^c Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна, майдан
Свободи, 4, 61022 Харків, Україна

Ми досліджуємо квантовий магнетик із симетрією SU(3) на зигзагоподібній драбинці — узагальнення моделі Гайзенберга, в якому обмінна взаємодія між найближчими сусідами замінена оператором перестановки P_{ij} двох фундаментальних представлень SU(3) («кольорів»): $H = J_1 \sum (P_{i,i+1}^{\text{rung}} + P_{i,i+1}^{\text{diag}}) + J_2 \sum P_{i,i+2}^{\text{leg}}$, $\alpha = J_2/J_1$. Такі моделі природно виникають у границі сильної кулонівської взаємодії моделі Габбарда SU(N)-ферміонів, де статистика Фермі–Дірака забороняє подвійне заселення вузла одним кольором.

Основний стан вивчається методом VUMPS в нескінченній системі з 6-вузловою коміркою; для великих розмірностей $D \sim 1000$ використано розігрів IDMRG2 та контрольоване розширення підпростору зв'язків (OptimalExpand).

При $\alpha = 0$ система безщільна й описується моделлю Весса–Зуміно–Віттена SU(3)₁ з центральним зарядом $c = 2$ (підтверджено екстраполяцією $c_{\text{eff}}(D)$ із нахилу залежності ентропії заплутаності від $\ln \xi$); лівої межі цієї фази немає. Зростання α спричиняє перехід Березинського–Костерліца–Таулеса до тримеризованої щільної фази з тричі виродженим основним станом. Використовуючи параметр порядку σ_∞ (екстрапольовану на $D \rightarrow \infty$ різницю енергій зв'язків рангу) та його характерну для БКТ форму $\sigma_\infty \sim A \exp(-b/\sqrt{\alpha - \alpha_{c2}})$, визначено межу переходу $\alpha_{c2} = 0.469 \pm 0.005$.

При великих α ознаки — спадання, а потім зростання c_{eff} до значень, близьких до 4, та степеневе спадання σ_∞ — вказують на можливий другий перехід у діапазоні $\alpha_{c3} \in (10, 20)$ до другої безщільної фази, що відповідає двом майже незалежним ланцюжкам SU(3)₁. Точне визначення α_{c3} — предмет подальшої роботи.

Ефективні моделі для опису плато намагнічення моделі Шастри–Сазерленда

Т. Гутак

*Інститут фізики конденсованих систем ім. І.Р. Юхновського
НАН України, вул. Свєнціцького, 1, 79011 Львів, Україна*

Яскравим ефектом впливу геометричної фрустрації на поведінку квантових антиферромагнетиків є наявність плато в кривій намагнічення. Однією із найбільш досліджених двовимірних сполук, які виявляють цю властивість, є $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ — експериментальна реалізація антиферромагнітної моделі Гайзенберга на ґратці Шастри–Сазерленда (див., наприклад, [1]).

Ми ж розглянемо так звану модель Ізинга–Гайзенберга на цій ґратці із взаємодіями Гайзенберга на димерних зв'язках та взаємодіями Ізинга на міждимерних зв'язках. Попри позірну простоту, поведінка такої моделі у сильному магнітному полі досить близька до моделі Шастри–Сазерленда. Після унітарного перетворення модель із змішаними взаємодіями можна звести до моделі Ізинга на квадраній ґратці [2], тобто досліджувати плато намагнічення в рамках ефективної моделі класичного ґраткового газу.

Дослідження проводилися разом із Т. Верхоляком, Т. Крохмальським і О. Держком (ІФКС ім. І. Р. Юхновського) і виконані в рамках проекту НФДУ 2023.03/0063, «Фрустровані квантові магнетики за різних зовнішніх умов».

[1] T. Nomura, P. Corboz *et al.*, [Nat. Commun.](#) **14**, 3769 (2023).

[2] T. Verkholyak, J. Strečka *et al.*, [Phys. Rev. B](#) **90**, 134413 (2014).

Модель Гейзенберга на ґратці гіперкагоме із тривимірними тензорними мережами

І.В. Лукін^{a, b}, А.Г. Сотніков^{a, c}

^a Інститут теоретичної фізики ім. О.І. Ахієзера ННЦ ХФТІ,
вул. Академічна, 1, 61108 Харків, Україна

^b Haiqi, Inc., 95 Third Street, San Francisco, CA 94103, USA

^c Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна, майдан
Свободи, 4, 61022 Харків, Україна

Модель Гейзенберга на ґратці гіперкагоме це приклад дуже фрустрованої магнітної системи спінів. Основний стан цієї моделі невідомий, а основними кандидатами є немагнітні впорядкування, такі як спінова рідина або кристал валентних зв'язків.

Ми вивчаємо основний стан цієї моделі за допомогою алгоритмів тензорних мереж. Ми розробили новий алгоритм оптимізації одного із видів станів тензорних мереж – станів спроектованих заплутаних симплексів (PESS) – на ґратці гіперкагоме і застосували розроблені нами раніше алгоритми знаходження середніх значень операторів для таких станів. Це дозволило нам отримати результати до розмірностей зв'язків $D = 20$ і дослідити різні можливі порушення трансляційної симетрії.

Наші результати вказують на основний стан у вигляді безщілинної спінової рідини (із, можливо, додатково порушеними дискретними симетріями ґратки) і на дуже конкурентну фазу кристалу валентних зв'язків із елементарною коміркою з 72 вузлів ґратки.

Термодинаміка квантового антиферромагнетика Гайзенберга на ґратці квадратне кагоме

М. Паримуда, Т. Крохмальський, О. Держко

*Інститут фізики конденсованих систем ім. І.Р. Юхновського
НАН України, вул. Свєнціцького, 1, 79011 Львів, Україна,
E-mail: mparymuda@ictp.lviv.ua*

Термодинамічні властивості антиферромагнетика Гайзенберга зі спіном $S = 1/2$ на ґратці квадратне кагоме досліджено з використанням аналітичного та числового методів. Розглянута модель характеризується двома нееквівалентними обмінними взаємодіями. Основну увагу приділено двопідґратковому режиму, в якому основний стан системи є феримагнітним.

Перший метод – це метод двочасових функцій Гріна в наближенні Тяблікова. Цей метод ґрунтується на рівняннях руху для функцій Гріна та дає змогу аналітично дослідити температурні залежності намагніченості, магнітної сприйнятливості й теплоємності.

Другий метод – це квантовий метод Монте-Карло. Його застосовано в нефрустрованій границі, в якій розглянута модель зводиться до моделі на ґратці Ліба. Для дослідження термодинамічних величин при скінченних температурах, зокрема намагніченості, також розглянуто XXZ анізотропію обмінної взаємодії.

Порівняння результатів, отриманих методом функцій Гріна, із даними квантового методу Монте-Карло дає змогу оцінити точність наближення Тяблікова. Після цього аналітичний метод функцій Гріна використано для дослідження термодинамічної поведінки системи у феримагнітному режимі за наявності геометричної фрустрації. Таким чином, поєднання аналітичного й числового методів дає змогу дослідити основні термодинамічні характеристики антиферромагнетика Гайзенберга зі спіном $S = 1/2$ на ґратці квадратне кагоме.

Це дослідження профінансовано Національним фондом досліджень України (2023.03/0063, Фрустровані квантові магнетики за різних зовнішніх умов).

Low-energy excitations and thermal transport in thermally reduced graphene oxide

Yu.V. Horbatenko, V.V. Sagan, V.V. Sumarokov, V.A. Konstantinov,
A.I. Krivchikov

*B.Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering of the NAS of
Ukraine, 47, Nauky Ave., 61103 Kharkiv, Ukraine,
E-mail: horbatenko@ilt.kharkov.ua*

Heat capacity and thermal conductivity of thermally reduced graphene oxide (trGO) are jointly analyzed to elucidate disorder-modified vibrational dynamics. We show that heat capacity measured over 0.3–275 K exhibits a low-temperature anomaly, with nonmonotonic C/T vs T^2 behavior below ~ 6 K [1], indicating excess low-energy excitations potentially associated with defects and structural heterogeneity.

Thermal-conductivity analysis reveals monotonic, glass-like behavior without the crystalline phonon maximum [2]. We demonstrate that $\kappa(T)$ cannot be consistently described by a Peierls contribution with a single activated coherence term, whereas a phenomenological multichannel model incorporating distinct coherence activation energies reproduces the data [1].

Together, these findings reveal complementary thermodynamic and transport signatures of structural disorder. Within the Peierls-coherence framework [3], we suggest that disorder modifies the relative contributions of propagating and non-propagating vibrational excitations to heat transport. Although a direct microscopic link between the calorimetric anomaly and individual transport channels remains unestablished, the combined results support a unified phenomenological interpretation of vibrational thermodynamics and thermal transport in trGO.

Acknowledgments: *The work of Yu.V.H., V.V.S., was supported by the National Research Foundation of Ukraine (Project №. 2023.03/0012).*

- [1] V.V. Sumarokov, A.V. Dolbin *et al.*, [Low Temp. Phys.](#), **50**(5), 185–187 (2024).
- [2] A. Jeżowski, A.I. Krivchikov *et al.*, Universal Multichannel Coherence-Mediated Thermal Transport in Carbon Allotropes: Experimental Evidence and Scaling Laws (to be published).
- [3] O.A. Korolyuk, A.I. Krivchikov *et al.*, [J. Non-Cryst. Solids](#), **690**, 124273 (2026).

Поверхнева вільна енергія перовскіту CsPbBr_3 з комп'ютерного експерименту

Т. Демчук^a, А. Стельмах^b, М. Копча^a, Р. Мельник^a, Я. Пацаган^a,
М. Боднарчук^{b,c}, М. Коваленко^{b,c}, А. Баумкетнер^a

^aІнститут фізики конденсованих систем ім. І.Р. Юхновського
НАН України, вул. Свенціцького, 1, 79011 Львів, Україна,
E-mail: demchuk@ictp.lviv.ua

^bDepartment of Chemistry and Applied Biosciences, Institute of Inorganic
Chemistry, ETH Zürich, Zürich, Switzerland

^cLaboratory for Thin Films and Photovoltaics, Empa – Swiss Federal
Laboratories for Materials Science and Technology, Überlandstrasse 129,
CH-8600 Dübendorf, Switzerland

Нанокристали CsPbBr_3 демонструють різноманіття форм, проте механізми їх анізотропного росту залишаються дискусійними. Одним із можливих пояснень є термодинамічна природа цього явища, зокрема відмінності поверхневих вільних енергій різних кристалографічних граней. Такі відмінності можуть зумовлювати неоднакову швидкість росту вздовж різних кристалографічних напрямків і, як наслідок, формування анізотропних нанокристалів. Метою роботи є розрахунок поверхневих вільних енергій основних кристалографічних граней CsPbBr_3 у термодинамічній границі.

Поверхневі вільні енергії орторомбічного CsPbBr_3 визначено за допомогою молекулярної динаміки та розрахунків абсолютної вільної енергії Гельмгольца методом кристалу Ейнштейна. Об'ємні кристали та нестехіометричні слаби, що містять два нееквівалентні класи граней досліджено для кількох латеральних розмірів і екстрапольовано до термодинамічної границі. Надлишковий вміст CsBr враховано через хімічний потенціал нейтральної одиниці CsBr , межі якого встановлені за допомогою розрахованих енергій взаємодії окремих іонів. Залежно від цього внеску абсолютні поверхневі вільні енергії лежать у межах приблизно $65\text{--}99\text{ }k_B T\text{ nm}^{-2}$. Водночас різниця між верхніми та бічними гранями залишається порядку сотих $k_B T\text{ nm}^{-2}$, а відповідне відношення поверхневих вільних енергій є близьким до одиниці. Отримані результати свідчать, що сама лише рівноважна термодинаміка голих поверхонь недостатня для пояснення формування виразно анізотропних нанострижнів або нанопластинок CsPbBr_3 .

Приготування та властивості фрактальних квантових станів, що відповідають піраміді Серпінського

А. Лупанов, Х.П. Гнатенко

Львівський національний університет ім. І. Франка, кафедра теоретичної фізики ім. професора І. Вакарчука, вул. Драгоманова, 12, 79005 Львів, Україна, E-mail: anton.lupanov@lnu.edu.ua

У доповіді представлено масштабований квантово-інформаційний підхід до побудови та аналізу багатокубітних станів $|\Psi_n\rangle$, що репрезентують тривимірну піраміду Серпінського [1].

$$|\Psi_n\rangle = \bigotimes_{m=1}^n |\phi_{3D}\rangle_m, \quad (1)$$

$$|\phi_{3D}\rangle = \frac{1}{2} (|000\rangle + |100\rangle + |010\rangle + |001\rangle). \quad (2)$$

На основі бінарного відображення просторових координат у обчислювальний базис розроблено ефективний протокол підготовки стану для довільної кількості ітерацій n , який складається з однокубітних поворотів R_y та керованих операцій із нульовим контролем.

Для фрактального стану, який відповідає піраміді Серпінського, аналітично знайдено спектр редукованої матриці густини та виявлено ефект інваріантності локальної заплутаності [2] попри експоненціальне зростання розмірності Гільбертового простору ($\dim \mathcal{H} = 2^{3^n}$), лінійна ентропія ($E_L = 0.25$) та ентропія фон Неймана ($S_V \approx 0.6009$ біт) окремого кубіта залишаються сталими при збільшенні кількості ітерацій. Додатково проаналізовано корелятори Паулі ($\langle ZZZ \rangle$).

Блочна структура запропонованого протоколу для приготування фрактальних квантових станів та використані в ньому типи квантових гейтів роблять його перспективним для експериментальної реалізації на квантових процесорах ери NISQ [3].

[1] E. van Veen, V.V. Sagan *et al.*, *Phys. Rev. B*, **93**, 115428 (2016).

[2] R. Horodecki, P. Horodecki *et al.*, *Rev. Mod. Phys.*, **81**, 865 (2009).

[3] O.J. Preskill, *Quantum*, **2**, 79 (2018).

Квантові обчислення швидкості еволюції спінових систем у магнітному полі та структурні властивості зважених графів

М. Качмар, Х.П. Гнатенко

Львівський національний університет ім. І. Франка, кафедра теоретичної фізики ім. професора І. Вакарчука, вул. Драгоманова, 12, 79005 Львів, Україна,

E-mail: markiiian.kachmar@lnu.edu.ua, khrystyna.gnatenko@gmail.com

Розглянуто спінові системи, які описуються моделлю Ізінга у поздовжньому магнітному полі. Досліджено залежність швидкості квантової еволюції [1] від параметрів системи та параметрів початкового стану. Для її визначення використано два підходи: обчислення середнього значення оператора еволюції для малих часів та вимірювання квантових кореляторів. Побудовано відповідні квантові протоколи та їх реалізовано на IBM Qiskit Aer Simulator. Показано також, що квантові стани спінових систем можуть розглядатися як квантові графові стани, яким відповідають напрямлені та зважені графи. Ваги вершин і ребер такого графа визначаються параметрами квантової системи. Встановлено зв'язок між швидкістю квантової еволюції та характеристиками відповідних зважених графів.

Також досліджено двоспінову систему з ХУ-взаємодією. Для довільного початкового незаплутаного стану отримано аналітичний вираз для швидкості еволюції. Досліджено її залежність від параметрів початкового стану і констант взаємодії аналітично та за допомогою квантових обчислень [2].

[1] A. Shimony, V.V. Sagan *et al.*, *N.Y. Acad. Sci.*, **755**, 3675-679 (1995).

[2] M. Kachmar, Kh. Gnatenko, *Visnyk Lviv Univ. Ser. Phys.*, **62**, 67-74 (2025).

Дослідження заплутаності чистих та змішаних багатокубітних квантових станів з використанням квантових обчислень

Н.А. Сусуловська

Львівський національний університет ім. І. Франка, кафедра теоретичної фізики ім. професора І. Вакарчука, вул. Драгоманова, 12, 79005 Львів, Україна, E-mail: n.a.susulovska@gmail.com

Розглянуто чисті квантові стани, що описуються складними структурами (графами, гіперграфами) [1, 2], а також змішані стани, задані на обмеженому двовимірному підпросторі. Заплутаність таких багатокубітних станів досліджено як аналітично, так і за допомогою квантових обчислень. У випадку чистих станів, геометрична міра заплутаності кубіта з рештою системи розраховується на основі її зв'язку з середнім значенням відповідного спінового оператора [3]. Зокрема, розглянуто графові стани, утворені дією операторів зсуву фази, та 3-однорідні гіперграфові стани з впорядкуванням ребер, утворені дією операторів RZZY. Отримано аналітичні залежності геометричної міри заплутаності кубіта від параметрів стану, а також встановлено її зв'язок з локальною структурою відповідних графів та гіперграфів, зокрема, ступенем вузла. Також, досліджено заплутаність для класу змішаних станів, утворених на двовимірному підпросторі, на основі розрахунку спінових кореляторів [3].

Запропоновано протоколи для приготування досліджуваних багатокубітних станів на універсальному квантовому приладі. Для особливих випадків таких станів геометричну міру заплутаності оцінено на основі вимірювання спостережуваних величин на реальних квантових процесорах компанії IBM, а також на ідеальному квантовому симуляторі. Результати квантових обчислень узгоджуються з теоретичними передбаченнями, що підтверджує застосовність сучасних квантових приладів з наявними похибками обчислень для дослідження властивостей квантових станів.

[1] N. A. Susulovska, *Ukr. J. Phys.*, **70**(3),161–169 (2025).

[2] N. A. Susulovska, Kh. P. Gnatenko, *arXiv:2609.30399* (2026).

[3] A. M. Frydryszak, M. I. Samar *et al.*, *Eur. Phys. J. D*, **71**,233 (2017).

Заплутаність фрактальних квантових станів, що відповідають множині Кантора

С.І. Пирин, Х.П. Гнатенко

Львівський національний університет ім. І. Франка, кафедра теоретичної фізики ім. професора І. Вакарчука, вул. Драгоманова, 12, 79005 Львів, Україна,

E-mail: stepan.pyryn@gmail.com, khrystyna.gnatenko@gmail.com

Квантова заплутаність є одним із фундаментальних явищ у квантовій механіці. Вона також є одним із важливих ресурсів квантових обчислень. Тому в останні роки дослідження заплутаності багатокубітних квантових станів привернули велику увагу (див. статті [1] та посилання в них).

Ми запропонували спосіб побудови фрактальних квантових станів, які відповідають множині Кантора. Досліджено заплутаність багатокубітних квантових станів, що відповідають різним ітераціям. Обчислено міру заплутаності, яка відома як відстань заплутаності [2]. Знайдено середню відстань заплутаності для фрактальних квантових станів, що відповідають різним ітераціям.

Ця робота виконана за підтримки проєкту ФФ-29НФ (№ 0126U001581) Міністерства освіти і науки України.

- [1] R. Horodecki, P. Horodecki *et al.*, [Rev. Mod. Phys.](#), **81**(2), 865-942 (2009).
- [2] D. Cocchiarella, S. Scali *et al.*, [Phys. Rev. A](#), **101**(4), 042129 (2020).

Квантові обчислення запутаності та швидкості еволюції двоспінової системи з моделлю XXZ

М. Тонне

Львівський національний університет ім. І. Франка, кафедра теоретичної фізики ім. професора І. Вакарчука, вул. Драгоманова, 12, 79005 Львів, Україна, E-mail: mykhailo.tonne@lnu.edu.ua

Квантова запутаність є однією з фундаментальних властивостей складних квантових систем і відображає неklasичні кореляції між їхніми підсистемами. У запутаному стані стан усієї системи не може бути представлений як добуток станів її окремих підсистем [1–3]. Відомі різні міри для кількісного оцінювання ступеня запутаності. У цій роботі ми використовуємо відстань запутаності як міру квантової запутаності та досліджуємо її поведінку у двоспіновій системі, описаній моделлю XXZ [4].

Властивості запутаності еволюційних квантових станів досліджуються для різних параметрів початкового стану та різних режимів взаємодії. Отримано аналітичні вирази для відстані запутаності, що дають змогу дослідити залежність запутаності від параметрів стану та анізотропії спінової взаємодії. Крім того, досліджено швидкість еволюції квантового стану та отримано аналітичний вираз для швидкості еволюції системи з моделлю XXZ. Особливу увагу приділено залежності швидкості еволюції від початкового стану та параметра анізотропії, зокрема таким режимам, як XX модель, модель Гейзенберга та границя Ізінга.

Аналітичні результати додатково перевірено за допомогою квантових симуляцій, виконаних із використанням AerSimulator. Симуляції відтворюють основні особливості, передбачені аналітично, і демонструють узгодженість із теоретичними результатами. Ці результати забезпечують узгоджений опис як запутаності, так і динамічних властивостей двоспінової системи XXZ та ілюструють, як анізотропія взаємодії впливає на еволюцію квантових станів.

- [1] A. Einstein, B. Podolsky *et al.*, *Phys. Rev.*, **47**, 777 (1935).
- [2] R. P. Feynman, *Int. J. Theor. Phys.*, **21**, 467 (1982).
- [3] R. Horodecki, P. Horodecki *et al.*, *Rev. Mod. Phys.*, **81**, 865 (2009).
- [4] M. P. Tonne, Kh. P. Gnatenko, *arXiv:2601.10650v2*.

Квантово-хімічна інтерпретація водневих зв'язків у рідкому етиламоній форміаті за результатами МД моделювання

І.І. Піскунов, О.М. Калугін

Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна, ННІ Хімії, майдан Свободи, 4, Харків, Україна, E-mail: ipiskunov@gmail.com

Створення пристроїв нової енергетики – паливних елементів і полімер-металевих композитів – вимагає безводних електролітів із високою стабільністю та швидким переносом заряду. Перспективними матеріалами є протонні йонні рідини (ПІР). Серед ПІР особливої уваги заслуговує етиламоній форміат (ЕАФ), який завдяки своїй аномально низькій в'язкості та лабільній сітці водневих зв'язків слугує ефективним середовищем для протонного транспорту.

Водночас глибоке фундаментальне розуміння міжмолекулярного транспорту в ЕАФ ускладнене наявністю стехіометричного та геометричного дисбалансу між трьома донорами катіона та двома акцепторними сайтами аніона. Класичне молекулярно-динамічне (МД) моделювання дозволяє успішно відтворити об'ємну наноорганізацію, однак воно позбавлене роздільної здатності за електронною структурою. З іншого боку, традиційні квантово-хімічні розрахунки ізольованих іонних пар у газовій фазі спотворюють реальну геометрію через специфіку підходу та відсутність реального теплового оточення. Тому постає потреба в застосуванні гібридних обчислювальних підходів, які поєднують статистичний ансамбль рідкого стану з топологічним аналізом електронної густини.

У цій роботі поєднано вибірку конфігурацій із траєкторій класичної МД із квантово-хімічними топологічними методами (QTAIM та NCI/RDG), застосованими безпосередньо до репрезентативних кластерів. Такий гібридний підхід забезпечує реалістичну характеристику як первинних йонних водневих зв'язків N–H...O, так і вторинних нековалентних взаємодій C–H...O. Отримані результати детально розкривають мікроскопічні механізми, за допомогою яких локальні електронні властивості та особливості перерозподілу заряду формують унікальну в'язкість і амфіфільну наноструктуру етиламоній форміату ЕАФ.

Робота виконана за підтримки МОН України, грант № 0126U003820.

Адсорбція плямистих частинок на поверхню з притягальними доменами

Я. Пацаган, Ю. Калюжний, А. Баумкетнер

*Інститут фізики конденсованих систем ім. І.Р. Юхновського
НАН України, вул. Свєнціцького, 1, 79011 Львів, Україна,
E-mail: yarkora@ictp.lviv.ua*

У роботі досліджується зв'язування лігандів із поверхнею твердого субстрату. Ліганди моделюються як сферичні частинки з притягальною взаємодією, локалізованою в окремій ділянці їхньої поверхні. Частинки розташовані поблизу нескінченної непроникної поверхні, з якою також взаємодіють за допомогою притягальних ділянок. Запропонована модель враховує такі ключові аспекти реальних фізичних систем як виключений об'єм лігандів, просторове обмеження та адсорбцію на поверхні. Проведено комп'ютерні симуляції для дослідження впливу густини, температури та інших факторів на процес зв'язування. Показано, що збільшення густини лігандів призводить до зростання поверхневого покриття, тоді як притягальна взаємодія між лігандами зменшує стабільність адсорбованого шару та його покриття. Отримані результати підтверджені проведеними аналітичними розрахунками.

Дана робота виконана за підтримки Нідерландської організації наукових досліджень і Національного фонду досліджень України в рамках програми “NWO Hor-On Call for Researchers”, грант № NWOPI.UKR.2025.014; Швейцарського національного наукового фонду (Проект IZURZ2_224907, українсько-швейцарські спільні дослідження Проекти: Конкурс пропозицій 2023-UA-CH-NANO);

Національного фонду досліджень України, грант № 2023.05/0019.

Квантово-хімічне моделювання комплексів Ag^+ із парами нуклеотидних основ

Є.С. Осокін, С.М. Перепелиця

*Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України,
вул. Метрологічна, 14-б, 03143 Київ, Україна, E-mail: osokin@bitp.kyiv.ua*

Металізована ДНК привертає значну увагу як перспективний матеріал для застосування у молекулярній електроніці. У роботі проводилось порівняльне теоретичне дослідження комплексів іонів Ag^+ з парами нуклеотидних основ для двох структурних типів металізованої Ag-ДНК, які експериментально встановлені в роботах, [1, 2]. Перший тип (умовно позначений як тип Яворніка) характеризується збереженням спарювання основ за типом Вотсона-Кріка та включенням іонів Ag^+ до складу пар основ, відповідно до експериментальних даних [1]. Другий структурний тип (умовно позначений як тип Кондо) супроводжується порушенням традиційного Вотсон-Крікового спарювання та відповідає структурі, встановленій у роботі [2]. Основну увагу приділено визначенню відносної енергетичної стабільності зазначених систем, а також оцінюванню термодинамічних аспектів їх утворення. Квантово-хімічні розрахунки були проведені в межах теорії функціонала густини із використанням функціонала B3LYP-D3, реалізованого у програмному комплексі Gaussian 03. Для іонів Ag^+ та атомів нуклеотидних основ були використані базисні набори Def2-TZVP ECP та 6-311++G(d,p), відповідно. Вплив водного середовища враховано в рамках моделі сольватації SMD. Отримані результати свідчать про те, що всі розглянуті комплекси «основа-Ag-основа» є стабільними. Водночас не всі з них спостерігаються експериментально. У випадку комплексів, що відповідають структурі типу Кондо, не виявлено комплексів за участю Ag^+ у парах основ аденін-аденін або аденін-тимін. Щодо комплексів аденін-Ag-аденін, наш аналіз показує, що, попри їхню відносно низьку енергію, вони є несприятливими для включення до подвійної спіралі ДНК. Найвищу термодинамічну стабільність продемонстрував нейтральний комплекс [7-деазагуанін(N1)- Ag^+ -цитозин(N3)]⁰, який виявився стабільнішим за свій канонічний аналог [гуанін(N1)- Ag^+ -цитозин(N3)]⁰. Зокрема, у низькочастотній області було виявлено коливання, пов'язані з рухом іонів Ag^+ .

Робота виконана за підтримки НФДУ (проект № 2025.07/0355)

- [1] U. Javornik, A. Perez-Romero *et al.*, [Nature Commun](#), **15**(1), 7763 (2017).
- [2] J. Kondo, Y. Tada *et al.*, [Nature chemistry](#), **9**(10), 956-960 (2017).

Потік реагентів через каталітичний гель: комп'ютерне моделювання методом дисипативної динаміки

Д. Яремчук, Я.М. Ільницький

*Інститут фізики конденсованих систем ім. І.Р. Юхновського
НАН України, вул. Свєнціцького, 1, 79011 Львів, Україна,
E-mail: yaremchuk@ictp.lviv.ua, iln@ictp.lviv.ua*

Синтез більшості хімікатів в індустрії відбувається з використанням каталізаторів, що впливає більш ніж на третину світового внутрішнього валового продукту. Найпоширенішим є гетерогенний каталіз, де однією з компонент є пористий матеріал з реагентами розчиненими у рідкій фазі, що заповнює пори. Коли у якості пористої матриці використовувати гель, це має низку переваг: контроль синтезу, коштовність виготовлення. У попередніх роботах Я.І. розглядався гель з декорованих частинок золота, і потік полімерів у плоскій щілині. В даному дослідженні ці роботи розширюються на випадок потоку реагентів через гель у плоскій щілині.

Використовуючи метод дисипативної динаміки ми валідували модель потоку реагентів у щілині відтворюючи лінійний закон для кінетичного рівняння другого порядку. Ми показали, що константа реакції нелінійно залежить від товщини шару в якому відбуваються реакції. Для гелю з каталітичними центрами було показано, що густіший гель змінює профіль швидкостей від параболічного до однорідного. Було знайдено, що густіший гель відповідає вищій ефективності реакції. Також було розглянуто можливість застосування супердифузійних процесів.

Дослідження виконано в рамках проекту НФДУ 2025.07/0366 “Функціональна ефективність складногалужених полімерів у застосуваннях пов’язаних з адсорбцією: комп’ютерне моделювання та передбачення”.

Дослідження адсорбції низькомолекулярних домішок мікрогелями мезоскопічними методами комп'ютерного моделювання

О. Калюжний, Я.М. Ільницький

*Інститут фізики конденсованих систем ім. І.Р. Юхновського
НАН України, вул. Свєнціцького, 1, 79011 Львів, Україна,
E-mail: ostapk@ictp.lviv.ua, iln@ictp.lviv.ua*

Методом дисипативної динаміки досліджено утворення мікрогелів та їхню здатність до адсорбції низькомолекулярних домішок з водного середовища. Невпорядковану полімерну мережу формували в явному розчиннику шляхом утворення зшивок між реакційноздатними центрами лінійних макромолекулярних ланцюгів, після чого систему урівноважували без подальшого утворення зв'язків. Розглядаються два механізми захоплення домішок: (а) за рахунок гідрофобних взаємодій між усіма мономерами та домішками та (б) за рахунок короткосяжного притягання між вибраними мономерами, що виконують роль афінних груп, та домішками. Порівнюються мікрогелі, в яких ці групи розміщені поблизу вузлів зшивання або на віддалених від них ділянках. Аналізується кінетика захоплення домішок та адсорбційна ємність мікрогелів залежно від розташування афінних груп.

Подяка: Роботу виконано за підтримки Національного фонду досліджень України в межах конкурсу «Передова наука в Україні», проєкт № 2025.07/0366 «Функціональна ефективність складногалужених полімерів у застосуваннях пов'язаних з адсорбцією: комп'ютерне моделювання та передбачення».

Моделювання агрегації білків на комп'ютерах

Р. Сокирко, А. Баумкетнер

*Інститут фізики конденсованих систем ім. І.Р. Юхновського
НАН України, вул. Свєнціцького, 1, 79011 Львів, Україна,
E-mail: sokyрко@ictp.lviv.ua*

Агрегація білків у амілоїдні фібрили з домінантною β структурою лежить в основі низки нейродегенеративних захворювань, таких як хвороба Альцгеймера. В даній роботі модельним об'єктом для вивчення фізичних механізмів цього процесу слугує короткий тетрапептид KFFE (Lys-Phe-Phe-Glu), здатний утворювати амілоїдоподібні фібрили [1]. Для дослідження агрегації цієї системи застосовано модель RAPID [2], в якій зберігається повна атомна геометрія пептиду, а вплив розчинника враховується через ефективні попарні потенціали, отримані методом ітеративної інверсії Больцмана з реперних симуляцій у явному розчиннику.

В рамках використаної моделі було отримано набір внутрімолекулярних потенціалів, що описують ефективні взаємодії між всіма амінокислотами пептиду та добре відтворюють його структуру в мономерному стані. Для міжмолекулярних взаємодій було проведено реперні симуляції з двома або чотирма молекулами пептиду в комірці моделювання. Отримані потенціали згодом були використані в симуляціях систем більшого розміру. Знайдено, що потенціали, отримані з реперної системи димерів, не призводять до утворення структур β листа в дослідженому пептиді. З іншого боку, потенціали, отримані з симуляцій тетрамерів, передбачають утворення β структури з ростом кількості пептидів в комірці моделювання, що добре узгоджується з експериментальними спостереженнями. Було проведено детальний аналіз структури утворених олігомерів, які характеризують початкові стадії процесу агрегації.

Дана робота виконувалась за підтримки Національного фонду досліджень України, грант 2023.05/0019.

- [1] L. Tjernberg, W. Hosia *et al.*, *J. Biol. Chem.*, **277**(45), 43243 (2002).
- [2] B. Ni, A. Baumketner, *J. Chem. Phys.*, **138**, 064102 (2013).

Моделювання напівгнучких полімерів: блукання Леві

Ю. Гончар, В.Б. Блавацька^{a, b}

^a Інститут фізики конденсованих систем ім. І.Р. Юхновського
НАН України, вул. Свенціцького, 1, 79011 Львів, Україна,
E-mail: julkohon@ictp.lviv.ua

^b Співпраця $\mathbb{L}^4$ & Докторський коледж із статистичної фізики складних систем, Ляйпціг-Лотарингія-Львів-Ковентрі, Європа

Випадкові блукання (random walk – RW) успішно застосовують для моделювання гнучких полімерних молекул у так званому Θ -розчиннику (гаусівських полімерів). У межах моделі RW кожен послідовний крок траєкторії відповідає одному мономеру полімерного ланцюга, тому час блукання t безпосередньо пов'язаний із кількістю мономерів N у відповідній макромолекулі.

Натомість складні органічні макромолекули, такі як ДНК, колаген і білки, містять об'ємні повторювані ланки зі складними молекулярними взаємодіями, що обмежують обертання навколо зв'язків, і є типовими представниками напівгнучких полімерів. Теоретично такі полімери описують у межах моделі червоподібного ланцюга, або моделі полімерних ланцюжків Краткі–Порода. Ключовою структурною характеристикою в них є персистентна довжина ℓ_p , пропорційна жорсткості ланцюга. Ідея цієї роботи полягає у встановленні відповідності між блуканням Леві і фізикою напівгнучких полімерів. У такому представленні траєкторію блукання Леві розглядають як послідовність прямолінійних сегментів з ℓ мономерів, довжини яких вибирають згідно зі степеневим розподілом Леві.

У цій роботі ми досліджуємо полімери, згенеровані обрізаними блуканнями Леві, та аналізуємо їхні конформаційні характеристики й характеристики форми в широкому діапазоні показників Леві. За допомогою масштабних чисельних симуляцій ми вивчаємо скейлінгову поведінку основних характеристик розміру і кількісно визначаємо, як перехід від браунівської динаміки до динаміки з домінуванням Леві-подібної поведінки змінює геометрію полімерних форм.

Авторський показчик

Haslhofer B., 19
Holovatch T., 19
Holovatch Y., 19
Horbatenko Yu.V., 27

Kitzler S., 19
Konstantinov V.A., 27
Krivchikov A.I., 27

Sagan V.V., 27
Sarkanych P., 19
Sumarokov V.V., 27

Аджимамбетов М., 21

Баумкетнер А., 28, 35, 39
Блавацька В.Б., 40
Боднарчук М., 28

Гнатенко Б., 16
Гнатенко Х.П., 29, 30, 32
Гончар Ю., 40
Гринів О.Р., 23
Гутак Т., 24

Демчук Т., 28
Держко О., 26

Закревський О.О., 15

Льницький Я.М., 37, 38

Калугін О.М., 34
Калюжний О., 38
Калюжний Ю., 35
Качмар М., 30

Коваленко М., 28
Ковальчук К.Г., 17
Копча М., 28
Крохмальський Т., 26

Лукін І.В., 23, 25
Лупанов А., 29

Мельник Р., 28

Осокін Є.С., 36

Паримуда М., 26
Пацаган Я., 28, 35
Перепелиця С.М., 36
Пирин С.І., 32
Піскунов І.І., 34
Полканов В., 20

Сапріянчук П., 18
Семенюк Б., 22
Сокирко Р., 39
Сотніков А.Г., 23, 25
Стельмах А., 28
Сусуловська Н.А., 31

Тонне М., 33

Фея О.Д., 22

Якименко О.І., 17
Яремчук Д., 37

Для нотаток

XXVI Всеукраїнська школа-семінар
молодих вчених
зі статистичної фізики
та теорії конденсованої речовини — 2026
Львів, 15–16 жовтня 2026 р.

Збірка тез

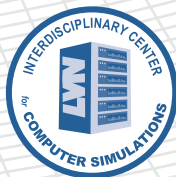
© Інститут фізики конденсованих систем
імені І.Р. Юхновського НАН України
Львів, 2026

Комп'ютерне макетування: Андрій Швайка

Укладання: Данило Добушовський

Графічний дизайн: Петро Сарканич

Організатори:



Підтримка:

